

17. シリコン中の酸素原子の挙動と伝導電子の輸送現象に及ぼす効果

杉原 康平

シリコンは今日、半導体デバイスとして大変重要な材料となっている。結晶成長過程において、シリコンに混入する酸素自身の振舞いについては赤外吸収などを中心とした数多くの研究があり、格子間酸素は電氣的に中性であることが知られている。しかし、酸素による電子の輸送現象に関する研究は極めて少ない。そこで、シリコン中の酸素が、電子散乱にどのような効果を及ぼすかについてマイクロ波によるサイクロトロン共鳴と赤外吸収(FTIR)の測定から考察した。

酸素を含んだシリコンのサイクロトロン共鳴線幅は酸素を含まないものに比べてかなり広がっており、室温における両試料の抵抗率がほとんど同程度であることから、この広がりは酸素による効果と考えられる。シリコン中の酸素はシリコンとシリコンの原子の間に入り、Si-O-Si構造をとっている。その間の角度は約162度で、水分子に似た三角分子構造を持っていることが赤外吸収などの研究から知られている。シリコンと酸素の結合の間には、その電気陰性度の違いから双極子モーメントが生じていると考えられる。そこで、共鳴線幅の広がりをシリコン-酸素対から成る双極子による散乱の効果と考えて双極子散乱モデルで散乱確率を見積もり、実験結果と比較検討する。

また、酸素を含むシリコンを450℃付近で熱処理することによって生じる特徴的なドナーについても同様の測定を行い、散乱確率を見積った。

18. 水素注入によるSiの不活性化と多孔質Siの光物性

西谷 輝

不純物のキャリアドリフトが、シリコン中の酸素原子の挙動に及ぼす効果について、赤外吸収とマイクロ波によるサイクロトロン共鳴測定から考察した。シリコン中の酸素原子は、シリコン原子の間に入り、Si-O-Si構造をとっている。その間の角度は約162度で、水分子に似た三角分子構造を持っていることが赤外吸収などの研究から知られている。シリコンと酸素の結合の間には、その電気陰性度の違いから双極子モーメントが生じていると考えられる。そこで、共鳴線幅の広がりをシリコン-酸素対から成る双極子による散乱の効果と考えて双極子散乱モデルで散乱確率を見積もり、実験結果と比較検討する。

小孔表面のダングリングボンドは水素によって覆われている。この多孔質 Si のフォトルミネッセンスを測定した。1.08 eV と 0.83 eV の付近にブロードなピークが観測された。1.08 eV の発光は伝導帯から不純物バンドへの遷移で、0.83 eV の発光はダングリングボンドに係る深いドナーが形成されていて、それから不純物バンドへの遷移であると考えられる。

19. 金属水素への He 原子の溶解性の理論的研究

牧野 至 洋

巨大惑星の内部のモデルを考えるうえで重要な働きをする超高圧下（数 Mbar～数百 Mbar）での金属水素への He 原子の溶解性を第一原理から計算した結果を報告する。この計算にあたって我々は、平面波バンド計算法により系の全エネルギーを求めた。この方法では、非常に多くの平面波を必要とするが我々は短波長の平面波を取込んだ基底関数を用いることにより比較的少数の平面波により非常に精度良く計算できた。この計算法の定式化とその有効性が非常に大きいこと、および H-He 系への応用、我々の得た計算結果と過去の計算結果との比較について報告する。

○大阪大学大学院基礎工学研究科物理系専攻

- | | |
|--|-------|
| 1. fcc - fct マルテンサイト変態における変態エンブリオの透過電子顕微鏡像コントラストの計算 | 渡邊 昌勝 |
| 2. Fe - Ni 合金の高圧下における磁化測定 | 浅野 雅己 |
| 3. 三角格子反強磁性体 CsFeBr ₃ の熱的磁氣的性質 | 岡本 匡史 |
| 4. ステップのある W (001) 表面再構成の計算機実験 | 萩野 徹男 |
| 5. 高温超伝導体 YBa ₂ Cu ₃ O _{7-δ} の Cu 置換による研究 | 川治 直樹 |
| 6. Ib 型のダイヤモンドのカラーセンターにおける光励起現象
～ NV センターのブリーチング～ | 奥田 真介 |